

prof. dr hab. Mariusz Makowski
Katedra Chemii Bionieorganicznej
Kierownik

Gdańsk, 11.06.2021 r.

Recenzja

osiągnięcia i całego dorobku naukowego, dydaktycznego oraz organizacyjnego
w postępowaniu habilitacyjnym **dr. inż. Piotra Aleksandra Batysa**
zatytułowanego:

**„Określenie na poziomie molekularnym mechanizmów tworzenia i właściwości
kompleksów polielektrolitów”.**

Dr inż. Piotr Batys uzyskał w 2010 roku tytuł zawodowy magistra inżyniera na Wydziale Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej. Opiekunem Jego pracy zatytułowanej „*Otrzymywanie porowatych tworzyw z proszków metali w procesie spiekania pod ciśnieniem – wpływ parametrów prasowania na kinetykę procesu utleniania wytworzonych materiałów*” był dr inż. Artur Jaroń. W październiku 2010 roku dr P. Batys rozpoczyna Interdyscyplinarne Studium Doktoranckie „*Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyk Przyszłości*” prowadzone przez trzy jednostki: Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk w Krakowie, Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH w Krakowie oraz Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego Polskiej Akademii Nauk w Krakowie. Zwieńczeniem Studium jest obroniona w 2015 roku praca doktorska pt. „*Surface and transport properties of nanoparticle multilayers*” wykonana pod kierunkiem dr. hab. Pawła Werońskiego, prof. IKiFP PAN. Od października 2015 roku, tuż po ukończeniu Studium Doktoranckiego, dr P. Batys zostaje

zatrudniony na stanowisku specjalisty w IKiFP PAN, w grupie badawczej „*Koloidy*” kierowanej przez prof. dr. hab. Zbigniewa Adamczyka. W lutym 2019 roku Habilitant awansuje na stanowisko adiunkta. W międzyczasie (03.2016 – 08.2018 r) odbywa On długoterminowy podoktorski staż w School of Chemical Engineering, Aalto University, Finlandia. Z informacji przedstawionych w dokumentacji awansowej Kandydata jasno wynika, iż nie ubiegał się On uprzednio o nadanie stopnia doktora habilitowanego. Wniosek dr. Piotra Aleksandra Batysa odpowiada wymaganiom stawianym w art. 219 ust. 1 pkt 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 roku *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* (Dz. U. 2018 poz. 1668 ze zm.). Na podstawie art. 221 ust. 10 tej samej ustawy wnioskuję Kandydat, aby komisja habilitacyjna podjęła uchwałę w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w trybie głosowania **tajnego**. Wniosek pod tytułem „*Określenie na poziomie molekularnym mechanizmów tworzenia i właściwości kompleksów polielektrolitów*” stanowi podstawę ubiegania się Pana dr. Piotra Batysa, zatrudnionego obecnie w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk w Krakowie, o stopień doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne. Autoreferat został napisany przejrzyście, zwięźle i starannym językiem. Znalazłem w nim tylko dwa edytorskie błędy (tzw. „literówki”), które nie mają wpływu na ocenę przedłożonego materiału.

Osiągnięcie naukowe

Osiągnięcie naukowe dr. Piotra Batysa zostało przedstawione jako cykl ośmiu, wieloautorskich (od 3 do 7 współautorów) prac [H1-H8] w czasopismach naukowych o znaczącym sumarycznym współczynniku wpływu (*Impact Factor*) wynoszącym 41,153. Suma punktów MNiSW, według ujednoliconego wykazu czasopism punktowanych, wynosi 1100. Liczba cytowań publikacji z cyklu, według bazy Scopus, wynosi 84 (bez autocytowań 62) (*dane na dzień 25.10.2020*). Liczba cytowań nie poraża, ale należy zwrócić uwagę na fakt, iż prace

te znajdują się krótko w obiegu. Artykuły stanowiące osiągnięcie Kandydata do stopnia naukowego ukazały się w periodykach naukowych w latach 2017-2020. W czterech pracach osiągnięcia **H1**, **H4**, **H7** i **H8** Kandydat jest pierwszym współautorem (deklarowany procentowy udział Kandydata w ich powstanie wynosi, odpowiednio: 60 %, 70 %, 60 % i 55 %). Trzy prace **H3**, **H5** i **H6** to druga pozycja Habilitanta na liście autorów z udziałami: 30 %, 35 % oraz 20 %. W pracy **H2** Pan dr P. Batys jest ostatnim współautorem z 25 % wkładem w jej powstaniu. Autorem do korespondencji jest Kandydat w pracach **H1**, **H7** i **H8**. Co ciekawe, tylko dwie prace z cyklu powstały przy całkowitym udziale polskich badaczy. Biorąc pod uwagę oświadczenia Kandydata oraz pozostałych współautorów deklarowanego materiału można precyzyjnie określić zakres osiągnięcia naukowego Habilitanta oraz jednoznacznie stwierdzić, iż Jego udział w powstaniu tych prac był znaczący. Wyniki badań w ramach osiągnięcia dr. Piotra Batysa są opublikowane w prestiżowych wysoko indeksowanych, zagranicznych czasopismach, m.in.: *ACS Cent. Sci*, *J. Phys. Chem. B i C*, *Macromolecules*, i innych.

Głównym celem badań przedstawionych w cyklu habilitacyjnego dr. Piotra Batysa była fizykochemiczna charakterystyka wybranych polielektrolitów (PE) w roztworach oraz wyjaśnienie na poziomie molekularnym mechanizmów tworzenia kompleksów polielektrolitów (KPE) oraz ich właściwości fizykochemicznych. Zjawiska te ze względu na swoją złożoność i czasem trudności techniczne nie mogą być badane w skali molekularnej przy użyciu wyłącznie metod eksperymentalnych. Pomocnym i użytecznym oraz komplementarnym narzędziem w tego rodzaju badaniach może być stosunkowo tanie teoretyczne modelowanie. Podstawową metodą do osiągnięcia założonego przez Habilitanta celu była dynamika molekularna (MD) z rozdzielczością atomową oparta na prawach fizyki Newtona. Nieustanny rozwój pól siłowych do opisu badanych układów, rosnąca moc obliczeniowa oraz wydajność oprogramowania sprawiają, że modelowanie molekularne jest bardzo efektywnym i coraz dokładniejszym narzędziem pomocnym w interpretacji wyników



badan eksperymentalnych, pozwalającym na badanie molekularnych mechanizmów fizykochemicznych procesów.

Jednym z problemów przed jakim obecnie stają badacze jest projektowanie i otrzymywanie substancji o szerokim spektrum zastosowań, nietoksycznych – najlepiej naturalnie występujących, z możliwością kontrolowania ich właściwości na drodze odpowiedniego doboru warunków ich tworzenia oraz zdolnościami szkieletu do łatwej modyfikacji strukturalnej. Obiektami spełniającymi m.in. te kryteria wydają się być polielektrolity (PE) oraz ich kompleksy (KPE). Ważnym jest zatem zrozumienie na poziomie molekularnym ich zachowania w roztworach przy użyciu różnego rodzaju eksperymentu, w tym teoretycznego. Polielektrolitami wybranymi do badań przez Habilitanta były polianiony: poli(kwas akrylowy) – PAA, poli(4-styrenosulfonian sodu) – PSS, poli(kwas L-glutaminowy) – PGA oraz polikationy: poli(chlorek diallilodimetyloamoniowy) – PDA, poli(L-lizyna) – PLL i poli(chlorowodorek alliloaminy) – PAH.

Pierwszym etapem zbliżającym Habilitanta do osiągnięcia założonego przez siebie naukowych celów było przeprowadzenie badań nad mechanizmem zjawiska kondensacji jonowej i wpływem rodzaju grupy funkcyjnej PE, przeciwjonu, pH, określenie zakresu stosowalności zmodyfikowanego równania Poissona-Boltzmann (PB) do opisu tego zjawiska, a także wykazanie, że grubość warstwy jonów skondensowanych jest parametrem uniwersalnym, niezależnym od rodzaju grupy funkcyjnej PE oraz rodzaju przeciwjonu [H1]. W konsekwencji, umożliwiło to na powiązanie kondensacji jonowej z liniową gęstością ładunku PE. Jako obiekty badawcze posłużyły tu następujące PE: PSS, PDA, PAA, PLL, PGA i przeciwjony: Na^+ , Cs^+ , K^+ , Cl^- i Br^- . Ponadto, wyznaczenie średnicy, długości, efektywnego ładunku, konformacji oraz gęstości w PLL [H2] i kompleksie PAH-GTMAC (chlorek poli(3-allilo-2-hydroksy-propylo-trimetyloamoniowy) [H6] w ich roztworach wodnych jest liniowo zależne od liczby monomerów w warunkach niskich wartości siły jonowej. Gruntowne zbadanie

zjawiska przejścia szklistego w uwodnionym KPE przedstawione w pracy [H3] związane jest z efektem rozrywania wodorowych wiązań pomiędzy cząsteczkami wody i grupami funkcyjnymi PE w parach jonowych wewnętrznie skompensowanych. Te wyniki wydają się stanowić uogólnienie zachowania tego typu PE i znalazło uznanie w postaci komentarza innego badacza, który podkreśla istotę tej obserwacji (M. Tirrell, *Polyelectrolyte Complexes: Fluid or Solid?*, *ACS Cent. Sci.* 4 (2018) 532–533. <https://doi.org/10.1021/acscentsci.8b00284>). Dalej Habilitant podjął się określenia wpływu temperatury, stopnia uwodnienia kompleksu PDADMA-PSS [H4] na wartości średniego współczynnika dyfuzji wody, średniego przesunięcia kwadratowego grup funkcyjnych w PAH i PAA [H5] oraz wpływu cząsteczek wody dla różnych PE (PDA, PSS, PAH, PAA) i powstających KPE [H4 i H7]. W wyniku tych badań zaobserwowano, że większość cząsteczek wody w KPE jest unieruchomiona [H4, H7], zaś efekty wywierane przez temperaturę i stopień uwodnienia na właściwości reologiczne układu wyjaśniają stosowanie zasady superpozycji do opisu eksperymentalnych badań. Ostatnia praca z cyklu [H8] jest naturalną konsekwencją poprzednio zaproponowanych badań teoretycznych i została poświęcona określeniu wpływu stopnia jonizacji na konformację oraz udziały α -helisy i β -struktur wybranych polipeptydów (PGA i PLL). Jest to studium poznawcze mające na celu pokazanie zakresu stosowalności powszechnie używanych i dostępnych w tego rodzaju badaniach pól siłowych.

Dorobek naukowy

Całkowity dorobek naukowy dr. Piotra Batysa na dzień złożenia wniosku wynosi 26 publikacji w czasopiśmie o zasięgu międzynarodowym, z czego 24 z listy JCR. Dziesięć z tych publikacji ukazało się przed uzyskaniem przez Kandydata stopnia doktora. Wszystkie publikacje współautorstwa Kandydata zostały zacytowane przez innych badaczy 149 razy, ich index Hirscha wynosi 9, a współczynnik wpływu wynosi ponad 103. Habilitant wygłosił

9 (1 przed uzyskaniem stopnia doktora) referatów oraz był współautorem 16 referatów innych badaczy (10 przed uzyskaniem stopnia doktora) na konferencjach międzynarodowych i krajowych. Ponadto był On autorem lub współautorem 33 (13 przed doktoratem) posterów z czego 19 było przedstawionych na konferencjach międzynarodowych. Nastąpił znaczący progres dorobku naukowego Habilitanta po uzyskaniu stopnia doktora w porównaniu do tego sprzed doktoratu. Dr Piotr Batys stosuje w swoich badaniach metody modelowania teoretycznego uzupełnione przez wyniki eksperymentalnych badań przeprowadzonych przez zespoły z Nim współpracujące. Oprócz wyników badań przedstawionych w osiągnięciu habilitacyjnym posiada On również udokumentowany dorobek nad fizykochemią układów koloidalnych, którą rozwija w swoim macierzystym ośrodku PAN oraz we współpracy z prof. Orlando Rojasem.

Dr Piotr Batys pełni obecnie funkcję kierownika w projekcie uzyskanym z NCN w ramach programu SONATA. Kierował projektem na zadanie badawcze MINIATURA przyznany również przez NCN oraz grantem dziekańskim na Akademii Górniczo-Hutniczej. W pięciu innych projektach Kandydat do stopnia naukowego był wykonawcą, w tym trzech przyznanych przez instytucje finansujące badania w Finlandii i jednego przez MNiSW. Habilitant był nagrodzony za najlepszy poster podczas konferencji „Computational Chemistry Days” w Helsinkach (2018 rok) oraz otrzymał trzykrotnie nagrodę za najlepszą oryginalną publikację naukową Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk (odpowiednio w 2014, 2015 i 2018 roku). Dr Piotr Batys otrzymywał stypendia naukowe z Wydziału Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej (2008-2010), Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH (2010-2014), stypendium projakościowe Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH (2013-2015) oraz naukowe dla najlepszych doktorantów tego samego wydziału (2013-2015). Oprócz długoterminowego podoktorskiego stażu (2,5 roku) w Aalto University (Finlandia) Kandydat uczestniczył również w 2019 roku w czterech, krótkich stażach (od 1 tygodnia do miesiąca) w ośrodkach naukowych

zagranicą, odpowiednio: Aalto University, Finlandia (2 tygodnie), Technical University of Munich, Niemcy (1 tydzień), Texas A&M University, USA (1 miesiąc) Vrije Universiteit Brussel, Belgia (1 tydzień). Trzy z tych wyjazdów (Finlandia, Niemcy, Belgia) zostały sfinansowane w ramach programu „Erasmus+ Mobility Programme”. Habilitant uczestniczył w kursach mających na celu podniesienie swoich kwalifikacji zawodowych. Były to dwa szkolenia z teoretycznego modelowania: „CCP5 Summer School 2014 – Methods in Molecular Simulation”, University of Manchester, Wielka Brytania (21-30.07.2014) oraz „2015 Martini Coarse-Graining Workshop”, University of Groningen, Holandia (23-28.08.2015).

Przedstawione w Autoreferacie plany naukowe dr. Piotra Batysa wydają się być interesujące i przemysłane. Planuje On dalej rozwijać się w tematyce badań nad układami koloidalnymi, separacją faz białek oraz nad określeniem kluczowych oddziaływań kontrolujących ten proces i ich możliwym zastosowaniu do wytwarzania biomateriałów. Tematyka ta jest już realizowana we współpracy z grupą prof. Markusa Lindera (Aalto University) oraz prof. Petera Tompy (Vrije Universiteit Brussel). Wspólnie z grupą badaczy dr Marią Sammalkorpi oraz prof. Markus Linderem (University Aalto) a także prof. Mikko P. Haataja (Princeton University USA) zaaplikował Kandydat o grant *Academy of Finland* w tej tematyce. Dodatkowo, dr Piotr Batys zamierza rozwijać i prowadzić badania nad PE i KPE związane z ich funkcjonalizowaniem cyklodekstrynami we współpracy z zagranicznymi naukowcami. Habilitant chciałby zbudować swój własny zespół badawczy w oparciu o studentów wykonujących pod Jego opieką prace doktorskie i magisterskie. Ten ostatni cel zamierza osiągnąć poprzez aplikowanie o granty rozwojowe i Preludium Plus z NCN.

Analiza dorobku stanowiącego osiągnięcie naukowe oraz dodatkowy materiał zgromadzony w postaci, oświadczeń współautorów prac przedstawionych i pozostałych informacji zawartych we wniosku do oceny można jednoznacznie wyodrębnić zadania zrealizowane bądź koordynowane przez dr. Piotra Batysa i wskazać co jest Jego osiągnięciem.

Przedstawione wyniki są interesujące, stanowią elementy nowości naukowej i wnoszą wkład w rozwój szeroko rozumianej molekularnej dynamiki układów biologicznych. Dodatkowo Kandydat ma jasno sprecyzowane naukowe plany na przyszłość mające na celu m.in budowanie swojego zespołu badawczego.

Charakterystyka osiągnięć dydaktycznych, organizacyjnych i popularyzujących naukę

Dorobek dydaktyczno-popularyzatorsko-organizacyjny Kandydata jest skromny. Można zauważyć jednak, że dr P. Batys pomimo pracy w jednostce badawczej stara się wykazać pozanaukową aktywnością. Bierze On kilkakrotnie czynny udział w Festiwalach Nauki w Krakowie, Dniach Otwartych Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN oraz przeprowadza dwa szkoleniowe wykłady podczas swoich pobytów w Texas A&M University (USA) oraz Vrije Universiteit Brussel (Belgia). Dr Piotr Batys dziewięciokrotnie pełnił rolę instruktora i opiekuna nad doktorantami, magistrantami oraz stażystami podczas swojego pobytu w Uniwersytecie Aalto w Finlandii. Kandydat nie należy do żadnych branżowych organizacji. Jest członkiem komisji recenzentów czasopisma „Polymer” (IF: 3.426), wydawnictwa MDPI oraz recenzuje artykuły w czasopismach naukowych.

Konkluzja

Na podstawie przedstawionego mi do oceny osiągnięcia dr. Piotra Batysa w zakresie monotematycznego osiągnięcia, dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego jednoznacznie stwierdzam, iż spełnia ono ustawowe kryteria stawiane kandydatom ubiegającym się o stopień naukowy doktora habilitowanego w dziedzinie *nauk ścisłych i przyrodniczych*, w dyscyplinie *nauki chemiczne*. Tym samym, **wnioskuję** do Rady Naukowej Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk w Krakowie o **nadanie** Jemu stopnia doktora habilitowanego.

